

Kapitel 6

Die zweite Quantisierung

In allen bisherigen Abschnitten dieses Skriptums wurde das Vielteilchen-System eines Elektronengases in einem kristallinen Festkörper näherungsweise in ein sog. *effektives* Einteilchenproblem umgewandelt. Das bedeutet, dass alle Wechselwirkungen der Elektronen untereinander durch ein *effektives* Kristallpotential beschrieben werden, mit welchem ein bestimmtes Elektron interagiert. Dass eine solche Vorgangsweise nur eine grobe Näherung der wahren Verhältnisse im Kristall sein können, liegt auf der Hand.

Zumindest einmal wurde in diesem Skriptum bisher das Problem *Vielteilchen-* bzw. *Einteilchen-Schrödingergleichung* erläutert, und zwar im Abschnitt 1.7 *Quantenmechanische Beschreibung von Kristallen*.

Dort heisst es:

Die stationäre Schrödingergleichung, welche die Eigenenergien E und die Eigenfunktionen Ψ des Vielelektronensystems beschreibt, hat die Form¹

$$\left\{ \sum_n^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_n^2 - \sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_I|} \right] + \frac{1}{2} \sum_m^N \sum_{\neq n}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|} \right\} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N),$$

d.h., der *Vielteilchen-Hamiltonian* \hat{H} kann als Summe von *Einteilchen-* und *Zweiteilchen-Operatoren* geschrieben werden:

$$\hat{H} = \sum_n \hat{O}^{(n)} + \frac{1}{2} \sum_m \sum_{\neq n} \hat{O}^{(m,n)}. \quad (6.1)$$

Von dieser Darstellung des Hamilton-Operators soll im Folgenden ausgegangen werden, wobei aber nicht die *stationäre*, sondern die *zeitabhängige* Schrödingergleichung der Startpunkt sein soll.

Die folgenden Ausführungen basieren im wesentlichen auf dem ersten Kapitel des Lehrbuchs von A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, erschienen 1971 beim Verlag McGraw-Hill, New York.

¹Die Teilchenkoordinaten x_1, x_2, \dots bedeuten die Orts- und Spinkoordinaten der Elektronen.

6.1 Transformation der Vielteilchen – Schrödingergleichung aus dem Orts– in den Teilchenzahlraum

Die zeitabhängige Schrödingergleichung eines Systems von N wechselwirkenden, spinlosen Bosonen hat die folgende allgemeine Form²:

$$\left[\sum_{n=1}^N \hat{O}^{(n)} + \frac{1}{2} \sum_m \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^N \hat{O}^{(m,n)} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = 0. \quad (6.2)$$

Der Operator $\hat{O}^{(n)}$ ist dabei ein *Einteilchenoperator* und wirkt nur auf die Koordinate \mathbf{r}_n des n -ten Teilchens. $\hat{O}^{(m,n)}$ ist hingegen ein *Zweiteilchenoperator*, welcher auf die Koordinaten \mathbf{r}_n und \mathbf{r}_m des n -ten und m -ten Teilchens wirkt. Letzterer wird im allgemeinen eine Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen beschreiben, die aus Symmetriegründen unabhängig davon sein wird, welches Teilchen als Quellpunkt gewählt wird.

Die Schwierigkeit einer Lösung von (6.2) liegt darin, daß die zu bestimmende Wellenfunktion für $N > 1$ von einer Vielzahl von Variablen abhängt und eine exakte Lösung dieser Gleichung bereits für wenige Teilchen praktisch unmöglich wird, ganz zu schweigen von der riesigen Teilchenzahl, wie sie für festkörperphysikalische Probleme typisch sind.

Die wechselwirkungsfreie Gleichung

Um einer Lösung dieses schwierigen Problems näherzukommen, geht man von einer *modifizierten* Gleichung (6.2) aus, für welche angenommen wird, daß die Zweiteilchenoperatoren Null sind (keine Wechselwirkung zwischen den Bosonen). In diesem Fall ist der Hamilton-Operator lediglich eine Summe aus dem Zeitoperator plus den N Einteilchenoperatoren, und für jede partikuläre Lösung von Glg. (6.2) ist der folgende *Separationsansatz* möglich:

$$\Psi_{E_1, E_2, \dots, E_N}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = u_{E_1}(\mathbf{r}_1) u_{E_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N) f(t). \quad (6.3)$$

Diese Wellenfunktion beschreibt den folgenden Vielteilchen-Zustand von N entkoppelten (nicht-wechselwirkenden) Teilchen:

1. Teilchen (Ort \mathbf{r}_1) im Quanten-Zustand E_1
2. Teilchen (Ort \mathbf{r}_2) im Quanten-Zustand E_2
- ⋮
- N . Teilchen (Ort \mathbf{r}_N) im Quanten-Zustand E_N .

ist. Wichtig ist dabei, daß die Indizes von E_n ($n = 1, \dots, N$) ein spezielles Teilchen bezeichnen, wobei jedem Teilchen das gesamte Spektrum der zur

²Obwohl in dieser Lehrveranstaltung zum größten Teil von Elektronen, also von Fermionen, die Rede ist, handelt dieses Kapitel von bosonischen Vielteilchensystemen. Der Grund dafür wird später erklärt.

Verfügung stehen Einteilchen-Quantenzustände zur Verfügung steht, d.h.,

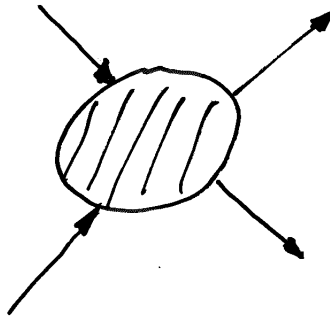
$$E_n \in \{\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \dots, \epsilon_\infty\}, \quad (6.4)$$

wobei bei bosonischen Systemen auch mehrere Teilchen im selben Quantenzustand sein können (z.B. $E_2 = E_7 = \epsilon_\beta$ usw.), weil hier das Pauliprinzip nicht gilt.

Ununterscheidbarkeit der Teilchen

Für die folgenden Überlegungen ist das quantenmechanisch geltende Prinzip der *Ununterscheidbarkeit* von Bosonen (und auch Elektronen) von fundamentaler Bedeutung:

Wenn quantenmechanische Teilchen mit den gleichen Eigenschaften vermischt werden (physikalisch ausgedrückt, wenn deren Wellenfunktionen sich überlagern), dann ist es nicht möglich, die einzelnen Teilchen individuell zu unterscheiden. Als Beispiel dafür diene die Teilchen-Teilchen-Streuung:



Bei diesem Prozess ist es aufgrund der Ununterscheidbarkeit unmöglich, ein bestimmtes herauskommendes Teilchen einem bestimmten hineingehenden Teilchen zuzuordnen.

Wegen dieser Tatsache kann aus den partikulären Lösungen (6.3) eine *allgemeine* Lösung von Glg. (6.2) für das nicht-wechselwirkende Bosonensystem gebildet werden, wenn die strenge Verknüpfung der durch die E_n gegebenen Quantenzahlen an die Teilchenpositionen \mathbf{r}_n aufgegeben werden und alle möglichen Permutationen der Teilchenkoordinaten zugelassen werden. Man erhält auf diese Weise die Wellenfunktion

$$\Psi_{E_1, \dots, E_N} \sim \sum_{\nu} \mathcal{P}_{\nu} \{u_{E_1}(\mathbf{r}_1) u_{E_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N)\} f(t) \quad (6.5)$$

mit \mathcal{P}_{ν} als dem Operator einer zulässigen Permutation der N Basisfunktionen $u_{E_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N)$.

Woher stammen nun die Entwicklungsfunktionen $u_{\epsilon_i}(\mathbf{r})$?

Wenn es sich nur um exakte Lösungen des *nicht-wechselwirkenden* Problems (6.2) handelt, ist die Beantwortung dieser Frage einfach: die Funktionen $u_\epsilon(\mathbf{r})$ sind die Eigenfunktionen des Einteilchen-Operators $\hat{O}^{(n)}$

$$\hat{O}^{(n)} u_\epsilon(\mathbf{r}) = c_\epsilon u_\epsilon(\mathbf{r}), \quad (6.6)$$

und die „Zeitfunktion“ $f(t)$ ergibt sich zu

$$f(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{N=1}^N c_{E_n} t \right\}.$$

Ein Ansatz für die Lösung von Glg. (6.2) inklusive der 2-Teilchen-Wechselwirkung

Heben wir nun in (6.2) die Vernachlässigung der Mehrteilchenoperatoren auf, so ist eine Entkoppelung des Systems in der soeben diskutierten Form nicht mehr möglich, da sich die Teilchen dann korreliert bewegen. Wir können aber eine Lösung des *wechselwirkenden* Problems aus den Ergebnissen des *nicht-wechselwirkenden* Problems entwickeln:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \sum_{E'_1} \sum_{E'_2} \dots \sum_{E'_N} A(E'_1, E'_2, \dots, E'_N; t) u_{E'_1}(\mathbf{r}_1) u_{E'_2}(\mathbf{r}_2) \dots u_{E'_N}(\mathbf{r}_N). \quad (6.7)$$

Die N -fache Summe bedeutet, daß jedes Teilchen alle Quantenzustände gemäß Glg. (6.4) besetzen kann. Die zeitabhängige Koeffizientenfunktion A stellt die *Wahrscheinlichkeits-Amplitude* dar, mit der ein bestimmter partikulärer Teilchenzustand realisiert wird; die entsprechende Wahrscheinlichkeit ist durch das Absolutquadrat $|A|^2$ dieser Funktion gegeben. Beachten Sie, daß im Falle eines wechselwirkenden Systems die E_n *keine guten Quantenzahlen* mehr sind.

- Im Zusammenhang mit dem Ansatz (6.7) soll hier noch betont werden, daß $\{u_\epsilon(\mathbf{r})\}$ jedes beliebige orthonormale Funktionensystem sein kann, das den Randbedingungen, denen die Lösungsfunktion der Vielteilchen-Schrödingergleichung unterworfen ist, genügt.

Im Folgenden geht es um die Berechnung der Koeffizientenfunktion $A(\dots E \dots; t)$ aus Glg. (6.7). Dazu verwendet man eine gutbekannte Technik, die darin besteht, daß man die Schrödingergleichung (6.2) „von links“ mit einem Satz von konjugiert-komplexen Basisfunktionen multipliziert und das Ergebnis über den gesamten Teilchenraum integriert:

$$\int d^3r_1 \dots d^3r_N u_{E_1}^*(\mathbf{r}_1) \dots u_{E_N}^*(\mathbf{r}_N) \times \left[\sum_{n=1}^N \hat{O}^{(n)} + \frac{1}{2} \sum_m \sum_{\neq n=1}^N \hat{O}^{(m,n)} + \dots - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = 0.$$

Setzt man die Entwicklung (6.7) für $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t)$ ein, ergibt sich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(E_1, \dots, E_N; t) = \sum_{E'_1} \cdots \sum_{E'_N} A(E'_1, \dots, E'_N; t) \\ \times \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N u_{E'_1}^*(\mathbf{r}_1) \cdots u_{E'_N}^*(\mathbf{r}_N) \left[\sum_{n=1}^N \hat{O}^{(n)} + \frac{1}{2} \sum_m \sum_{\neq n}^N \hat{O}^{(m,n)} \right] u_{E'_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{E'_N}(\mathbf{r}_N),$$

und man erhält nach einer etwas mühevollen aber nicht schwierigen Rechnung ein Ergebnis, das als Summe der beiden Terme S_1 (für die Einteilchen-Operatoren) und S_2 (für die Zweiteilchen-Operatoren) dargestellt werden kann:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(E_1, \dots, E_N; t) = S_1 + S_2 \quad (6.8)$$

mit

$$S_1 = \sum_{n=1}^N \sum_W A(E_1, \dots, E_{n-1}, W, E_{n+1}, \dots, E_N; t) \langle E_n | \hat{O}^{(n)} | W \rangle \quad (6.9)$$

und

$$S_2 = \frac{1}{2} \sum_m \sum_{\neq n}^N \sum_W \sum_{W'} A(E_1, \dots, E_{m-1}, W, E_{m+1}, \dots, E_{n-1}, W', E_{n+1}, \dots, E_N; t) \\ \times \langle E_m E_n | \hat{O}^{(m,n)} | W W' \rangle \quad (6.10)$$

Die in den Gleichungen (6.9) und (6.10) vorkommenden Matrixelemente lauten

$$\langle E_n | \hat{O}^{(n)} | W \rangle = \int d^3 r_n u_{E_n}^*(\mathbf{r}_n) \hat{O}^{(n)} u_W(\mathbf{r}_n) \quad (6.11)$$

bzw.

$$\langle E_m E_n | \hat{O}^{(m,n)} | W W' \rangle = \\ \int d^3 r_m d^3 r_n u_{E_m}^*(\mathbf{r}_m) u_{E_n}^*(\mathbf{r}_n) \hat{O}^{(m,n)} u_W(\mathbf{r}_m) u_{W'}(\mathbf{r}_n). \quad (6.12)$$

Symmetrie der Bosonen-Vielteilchenfunktion:

Ausgehend von den allgemeinen Symmetrieeigenschaften der Vielteilchenwellenfunktion des untersuchten Boseteilchensystemes kann man für die Entwicklungsfunktionen A eine wesentliche Symmetrieeigenschaft herleiten. Zunächst gilt ganz allgemein:

$$\Psi(\dots \mathbf{r}_m, \dots, \mathbf{r}_n, \dots; t) \stackrel{!}{=} \Psi(\dots \mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_m, \dots; t). \quad (6.13)$$

- Eine Boseteilchen-Wellenfunktion ist symmetrisch bezüglich der Vertauschung der Koordinaten zweier beliebiger Teilchen.

Dies hat auf den Ansatz (6.7) die folgende Auswirkung:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m, \dots, \mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \\ \sum_{E_1} \cdots \sum_{E_m} \cdots \sum_{E_n} \cdots \sum_{E_N} A(E_1, \dots, E_m, \dots, E_n, \dots, E_N; t) \times \\ u_{E_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{E_m}(\mathbf{r}_m) \cdots u_{E_n}(\mathbf{r}_n) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N). \end{aligned}$$

Da ein Platztausch zwischen den Funktionen $u_{E_m}(\mathbf{r}_m)$ und $u_{E_n}(\mathbf{r}_n)$ keine Auswirkungen hat, folgt zwangsläufig

$$A(E_1, \dots, E_m, \dots, E_n, \dots, E_N; t) \stackrel{!}{=} A(E_1, \dots, E_n, \dots, E_m, \dots, E_N; t)$$

damit (6.13) erfüllt ist. Ganz allgemein gilt somit:

$$A(\mathcal{P}\{E_1 \dots E_N\}; t) \equiv A(E_1 \dots E_N; t), \quad (6.14)$$

wobei $\mathcal{P}\{\dots\}$ eine beliebige Permutation der Indizes $1 \dots N$ bedeutet.

Der entscheidende Punkt dieses Kapitels!

Übergang in den Teilchenzahlraum:

- Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen ist es physikalisch unwesentlich, *welches* Teilchen in einem bestimmten Quantenzustand ist; es ist vollkommen ausreichend anzugeben, *wieviele* Teilchen sich in einem bestimmten Quantenzustand befinden.
- Dies bedeutet, daß der Gesamtzustand des Systems eindeutig bestimmt ist, wenn man angibt, durch wieviele Teilchen in welchen Quantenzuständen dieser Gesamtzustand realisiert wird.
- Wenn z.B. der s -te Quantenzustand von n_s Teilchen besetzt ist, nennt man n_s die Besetzungszahl dieses Quantenzustandes.

Die Anwendung dieser Prinzipien bedeutet den Übergang in den Teilchenzahlraum.

Für die Wahrscheinlichkeit, das in einem wechselwirkenden Bosonensystem eine bestimmte Teilchenzahl-Verteilung auftritt, gilt die Gleichung

$$|\tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_s, \dots, n_\infty; t)|^2 = \sum_{\mathcal{P}\{\}} |A(E_1, E_2, \dots, E_k, \dots, E_N; t)|^2, \quad (6.15)$$

wobei noch die folgende Nebenbedingung zu berücksichtigen ist:

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N. \quad (6.16)$$

- Die Interpretation der Glg. (6.15) ist einfach: da alle Vielteilchenzustände, die zur selben Teilchenzahl-Verteilung führen, wegen der Ununterscheidbarkeit der einzelnen Teilchen *gleich wahrscheinlich sind*, egal welche Teilchen die Quantenzustände besetzen, muss die Gesamtwahrscheinlichkeit für das Auftreten eines „Teilchenzahl-Musters“ die Summe aller Wahrscheinlichkeiten dieser Vielteilchenzustände sein.
- Da $\mathcal{P}\{\}$ die möglichen Realisierungen des Vielteilchensystemes beschreibt, bedeutet $\sum A$ in (6.15), daß aufgrund der Symmetrie-Eigenschaft (6.14) $|A|^2$ nur mit der Anzahl aller Realisierungsmöglichkeiten zu multiplizieren ist, um $|\tilde{A}|^2$ zu erhalten. Damit folgt für (6.15):

$$|\tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t)|^2 = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} |A(E_1, \dots, E_N; t)|^2$$

bzw.

$$A(E_1, \dots, E_N; t) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!} \right)^{1/2} \tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t) \quad (6.17)$$

Als nächsten Schritt in den Teilchenzahlraum geht es nun darum, die durch die Gleichungen (6.8-6.12) definierte Differentialgleichung für $A(E_1, \dots, E_N; t)$ in eine entsprechende Gleichung für $\tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t)$ umzurechnen. Wir zeigen diese Rechnung hier nur für den einfacheren Term S_1 ; für den zweiten Term S_2 ist die Prozedur ähnlich, nur bedeutend aufwändiger.

Der Term S_1 lautet gemäß der Gleichung (6.9)

$$S_1 = \sum_{k=1}^N \sum_{W=1}^{\infty} \langle E_k | \hat{O} | W \rangle A(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_N; t). \quad (6.18)$$

Dieser Term beschreibt offensichtlich den Übergang des k -ten Teilchens von ‘seinem’ Zustand E_k in irgendeinen anderen mit W bezeichneten Zustand (der natürlich auch wieder E_k sein könnte.) Im *Teilchenzahlbild* bedeutet dies aber, daß der Quantenzustand E_k einmal weniger, der Quantenzustand W jedoch einmal mehr besetzt sein wird:

$$\begin{aligned} n_{E_k} &\longrightarrow n_{E_k} - 1 \\ n_W &\longrightarrow n_W + 1. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Berücksichtigt man dieses Faktum, so ergibt sich durch Einsetzen von Glg. (6.17) in Glg. (6.18) und

$$\begin{aligned} S_1 = & \sum_{k=1}^N \sum_{W=1}^{\infty} \langle E_k | \hat{O} | W \rangle \left(\frac{n_1! \dots (n_{E_k} - 1)! \dots (n_W + 1)! \dots n_\infty!}{N!} \right)^{1/2} \times \\ & \tilde{A}(n_1, \dots, n_{E_k} - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_\infty; t). \end{aligned} \quad (6.20)$$

In (6.20) ist es wiederum unwichtig, *welches* Teilchen gerade beschrieben wird. An Stelle der Summierung über die N Teilchen kann man über alle möglichen Quantenzustände summieren, wobei aber die Summanden mit der Besetzungszahl des jeweiligen Zustandes zu gewichten sind:

$$\sum_{k=1}^N \dots \equiv \sum_{E=1}^{\infty} n_E \dots \quad (6.21)$$

Damit folgt aus Glg. (6.20) für $E \neq W$

$$\begin{aligned} S_1 = & \sum_{E=1}^{\infty} \sum_{W=1}^{\infty} n_E \langle E | \hat{O} | W \rangle \left(\frac{n_1! \dots (n_E - 1)! \dots (n_W + 1)! \dots n_{\infty}!}{N!} \right)^{1/2} \times \\ & \tilde{A}(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_{\infty}; t), \end{aligned} \quad (6.22)$$

und für $E = W$ gilt natürlich

$$S_1 = \sum_{E=1}^{\infty} n_E \langle E | \hat{O} | E \rangle \left(\frac{n_1! \dots n_{\infty}!}{N!} \right)^{1/2} \tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t). \quad (6.23)$$

Für die Differentialgleichung (6.8) ergibt sich somit (ohne den zweiten Term S_2 anzuschreiben) der Ausdruck

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\frac{n_1! \dots n_{\infty}!}{N!} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t) = & \sum_E n_E \langle E | \hat{O} | E \rangle \left(\frac{n_1! \dots n_{\infty}!}{N!} \right)^{1/2} \tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t) + \\ & \sum_E \sum_{W \neq E} n_E \langle E | \hat{O} | W \rangle \left(\frac{n_1! \dots (n_E - 1)! \dots (n_W + 1)! \dots n_{\infty}!}{N!} \right)^{1/2} \times \\ & \tilde{A}(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_{\infty}; t) + \dots \end{aligned} \quad (6.24)$$

bzw.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t) = & \sum_E n_E \langle E | \hat{O} | E \rangle \tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t) + \\ & \sum_E \sum_{W \neq E} \langle E | \hat{O} | W \rangle \sqrt{n_E} \sqrt{n_W + 1} \tilde{A}(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_{\infty}; t) + \dots \end{aligned} \quad (6.25)$$

Ein neuer Zustandsvektor ...

Die Funktion $|\tilde{A}(n_1, \dots, n_{\infty}; t)|^2$ ist die *Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Besetzungszustand*. Diesen Zustand kann man im Hilbertraum durch einen abstrakten zeitunabhängigen Zustandsvektor beschreiben:

$$|n_1, n_2, \dots, n_{\infty}\rangle, \quad (6.26)$$

wobei diese Basis $\{|n\rangle\}$ soll vollständig und orthonormal sein soll:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty | n_1, n_2, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_\infty, n'_\infty} \quad (6.27)$$

und

$$\sum_{n_1, \dots, n_\infty} |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_\infty| = 1. \quad (6.28)$$

Die Anteile $|n_1\rangle, |n_2\rangle, \dots, |n_\infty\rangle$ des Diracvektors stellen die entsprechenden Einzelzustände dar.

Äquivalent zum entsprechenden Ansatz in der Ortsdarstellung (6.7)

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \\ \sum_{E'_1} \sum_{E'_2} \cdots \sum_{E'_N} A(E'_1, E'_2, \dots, E'_N; t) u_{E'_1}(\mathbf{r}_1) u_{E'_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E'_N}(\mathbf{r}_N) \end{aligned}$$

kann ein beliebiger Bosonenzustand für ein System mit Wechselwirkung in der Form

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_\infty=0}^{\infty} \tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \quad (6.29)$$

mit

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k \stackrel{!}{=} N$$

angeschrieben werden, wobei die Koeffizientenfunktion durch die Dgl. (6.25) bestimmt wird.

Wie sieht die Ortsdarstellung des Diracvektors $|n_1 \cdots n_\infty\rangle$ aus?

In diesem Abschnitt geht es um die Berechnung von

$$\langle \mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N | n_1 \cdots n_\infty \rangle :$$

- Aus Glg. (6.29) folgt sofort

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N | \Psi(t) \rangle &\equiv \Psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N; t) \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_\infty=0}^{\infty} \tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t) \langle \mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N | n_1 \cdots n_\infty \rangle \end{aligned} \quad (6.30)$$

- Andererseits geht man von der Glg. (6.7) aus, also von

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \sum_{E'_1} \sum_{E'_2} \cdots \sum_{E'_N} A(E'_1, E'_2, \dots, E'_N; t) u_{E'_1}(\mathbf{r}_1) u_{E'_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E'_N}(\mathbf{r}_N).$$

- Diese Entwicklung enthält eine N -fach-Summe, welche alle Kombinationen der Einteilchen-Quantenzahlen $E_1 \cdots E_N$ umfasst.

Dieselbe Mannigfaltigkeit kann erreicht werden, wenn man eine *beliebige* Folge von E_1 bis E_N hernimmt und diese allen Permutationen unterwirft. Damit hat man alle Möglichkeiten berücksichtigt, die zu der bestimmten Folge von Besetzungszahlen n_1 bis n_∞ gehören. Nun muss nur noch über alle Kombinationen der n_i aufsummiert werden.

Auf diese Weise ergibt sich

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_\infty} A(E_1, E_2, \dots, E_N; t) \sum_{\nu} P_{\nu} \{u_{E_1}(\mathbf{r}_1) u_{E_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N)\} .$$

- Ersetzt man hier die Koeffizientenfunktion A durch die Funktion \tilde{A} [s. Glg. (6.17)], so erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_\infty} \tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t) \\ &\times \sqrt{\frac{n_1! \cdots n_\infty!}{N!}} \sum_{\nu} P_{\nu} \{u_{E_1}(\mathbf{r}_1) u_{E_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N)\} , \end{aligned}$$

wobei die rot markierten Teile bereits in Glg. (6.30) vorkommen. Der weitere Vergleich ergibt sofort

$$\langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, \dots, n_\infty \rangle = \sqrt{\frac{n_1! \cdots n_\infty!}{N!}} \sum_{\nu} \{P_{\nu} u_{E_1}(\mathbf{r}_1) u_{E_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{E_N}(\mathbf{r}_N)\} . \quad (6.31)$$

Operatoren im Teilchenzahlraum

Was nun für eine vollständige Darstellung im Teilchenzahlraum noch fehlt, sind Operatoren, *die direkt die Besetzungszahlen im Diracvektor*

$$|n_1 \cdots n_\infty \rangle$$

beeinflussen.

Die im Folgenden definierten *Vernichtungsoperatoren* \hat{b}_k bzw. *Erzeugungsoperatoren* \hat{b}_k^\dagger sind Ihnen bereits in der Quantenmechanik-Vorlesung im Kapitel *Harmonischer Oszillator* begegnet:

$$\begin{aligned} \hat{b}_k |n_1 \cdots n_k \cdots n_\infty \rangle &\stackrel{!}{=} \sqrt{n_k} |n_1 \cdots n_k - 1 \cdots n_\infty \rangle , \\ \hat{b}_k^\dagger |n_1 \cdots n_k \cdots n_\infty \rangle &\stackrel{!}{=} \sqrt{n_k + 1} |n_1 \cdots n_k + 1 \cdots n_\infty \rangle . \end{aligned}$$

weil diese Operatoren nur auf die Besetzungszahl des k -ten Einteilchenzustandes wirken, genügt im Folgenden die einfachere Schreibweise

$$\begin{aligned}\hat{b}_k |n_k\rangle &\stackrel{!}{=} \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \\ \hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle &\stackrel{!}{=} \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle.\end{aligned}\quad (6.32)$$

Bereits diese Definition zeigt, dass $\hat{b}_k \neq \hat{b}_k^\dagger$, d.h., dass diese Operatoren *nicht hermitesch, sondern zueinander hermitesch adjungiert sind*. Der Beweis dafür ist leicht zu führen:

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{b}^\dagger | n \rangle &= \sqrt{n+1} \langle n' | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \\ \langle n | \hat{b} | n' \rangle^* &= \sqrt{n'} \langle n | n'-1 \rangle^* = \sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1},\end{aligned}$$

also

$$\langle n' | \hat{b}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{b} | n' \rangle^* \quad \text{q.e.d.}$$

Aus den Definitionen (6.32) folgen sofort die Eigenwertgleichungen

$$\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k |n_k\rangle = \hat{b}_k^\dagger \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle = \sqrt{n_k} \sqrt{n_k - 1 + 1} |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \quad (6.33)$$

bzw.

$$\hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle = \hat{b}_k \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle = (n_k + 1) |n_k\rangle. \quad (6.34)$$

- Die Zustände $|n_k\rangle$ sind offenbar Eigenzustände der hermiteschen Operatoren $\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ (*Teilchenzahl-Operator*) bzw. $\hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger$ mit den reellen Eigenwerten n_k und $n_k + 1$.

Aus den Eigenwertgleichungen (6.33) und (6.34) folgen weiters die *Vertauschungsrelationen*

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger \right] |n_k\rangle = \left(\hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger - \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right) |n_k\rangle = (n_k + 1 - n_k) |n_k\rangle$$

oder

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger \right] = 1; \quad \left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger \right] = \delta_{k,k'}, \quad (6.35)$$

und analog

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'} \right] = \left[\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger \right] = 0. \quad (6.36)$$

Eine wichtige Eigenschaft ist auch die leicht zu beweisende Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \right] = 0. \quad (6.37)$$

Es folgt daraus, daß die Operatoren $(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k), (\hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l), \dots$ alle dasselbe Eigenvektorensystem haben; dies eröffnet die Möglichkeit, den Gesamtzustand als Produkt von Einzelzuständen anzuschreiben:

$$|n_1, \dots, n_\infty\rangle \equiv |n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |n_\infty\rangle. \quad (6.38)$$

Der bosonische Vielteilchen-Hamiltonoperator in der Teilchenzahl-Darstellung

Abschliessend gilt es nun zu zeigen, dass der Ansatz (6.29) der Schrödingergleichung (6.2) genügt. Dazu bestimmt man zunächst die zeitliche Ableitung von $|\Psi(t)\rangle$ >:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle .$$

Das ergibt unter Verwendung von Glg. (6.25):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E n_E \langle E | \hat{O} | E \rangle \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \\ &+ \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E \sum_{E \neq W} \sqrt{n_E(n_E + 1)} \langle E | \hat{O} | W \rangle \times \\ &\quad \tilde{A}(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \dots \end{aligned}$$

Als nächsten Schritt verschiebt man nun die „Unregelmässigkeiten“ aus der Argumentliste von \tilde{A} in die Diracvektoren: dies gelingt mittels der Index-Transformationen

$$\begin{aligned} n_l &\rightarrow n'_l & l \neq E \neq W \\ n_E - 1 &\rightarrow n'_E \\ n_W + 1 &\rightarrow n'_W . \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E \langle E | \hat{O} | E \rangle n_E \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \\ &+ \sum_{n'_1, \dots, n'_\infty} \sum_E \sum_{E \neq W} \langle E | \hat{O} | W \rangle \sqrt{n'_E + 1} \sqrt{n'_W} \tilde{A}(n'_1, \dots, n'_E, \dots, n'_W, \dots, n'_\infty; t) \\ &\times |n'_1, \dots, n'_E + 1, \dots, n'_W - 1, \dots, n'_\infty\rangle + \dots \end{aligned}$$

Gemäss der Definitionen (6.32) für die Operatoren \hat{b}_k und \hat{b}_k^\dagger gilt für $E \neq W$:

$$|n_1 \rangle \dots \sqrt{n_E + 1} |n_E + 1 \rangle \dots \sqrt{n_W} |n_W - 1 \rangle \dots |n_\infty \rangle = \hat{b}_E^\dagger \hat{b}_W |n_1 \dots n_E \dots n_W \dots n_\infty \rangle ,$$

und damit folgt weiters

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= \\ &\sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E n_E \langle E | \hat{O} | E \rangle \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \\ &+ \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E \sum_{E \neq W} \langle E | \hat{O} | W \rangle \hat{b}_E^\dagger \hat{b}_W \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \dots \end{aligned}$$

Wegen $\hat{b}_E^\dagger \hat{b}_E |n_E\rangle = n_E |n_E\rangle$ kann ab nun die Aufspaltung in den Term $E = W$ bzw. die Terme $E \neq W$ entfallen, und man erhält

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \sum_E \sum_W \langle E | \hat{O} | W \rangle \hat{b}_E^\dagger \hat{b}_W \tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle + \dots \quad (6.39)$$

Die rot markierten Elemente der obigen Gleichung bedeuten gemäss Glg. (6.29) den Vielteilchenzustand wechselwirkender Bosonen im Teilchenzahlbild, sodass sich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \left\{ \sum_E \sum_W \langle E | \hat{O} | W \rangle \hat{b}_E^\dagger \hat{b}_W + \dots \right\} |\Psi(t)\rangle$$

ergibt. Der Ausdruck in $\{\dots\}$ stellt dabei *den Hamiltonoperator in der Teilchenzahl-Darstellung (in der 2. Quantisierung)* dar.

In diesem Kapitel wurde der Übergang vom Ortsraum in der Teilchenzahlraum nur für die Einteilchen-Operatoren explizit demonstriert. Für die Zweiteilchen-Operatoren, welche die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung beschreiben, geht diese Rechnung im Prinzip genau so, ist aber wesentlich umfangreicher.

In der letzten Gleichung dieses Kapitels ist nun der gesamte Hamilton-Operator dargestellt, wobei die bisher verwendeten Zustands-Indizes E und W durch die üblicheren Summen-Indizes i, j usw. ersetzt wurden:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \langle i | \hat{O} | j \rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | \hat{O} | k, l \rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_k. \quad (6.40)$$

Anmerkung: Die folgenden Abschnitte 6.2 *Einführung von Feldoperatoren* und 6.3 *Das Schrödinger- und das Heisenbergbild* spielen für meine weiteren Ausführungen im Rahmen dieser LV keine Rolle.

Sie sind aber für jene Studentinnen und Studenten von Bedeutung, welche meine LV *Elektronentheorie des Festkörpers* besuchen wollen.

6.2 Einführung von Feldoperatoren

Der Ausgangspunkt der Darstellung ist die Vielteilchen – Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = {}_{II}\hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

$${}_{II}\hat{H} = \sum_{i,j} \langle i | \hat{O} | j \rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | \hat{O} | k, l \rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_k + \dots$$

Die \hat{b}_i und \hat{b}_i^\dagger sind Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren der Bosonen – Einteilchenzustände und die Matrixelemente sind durch

$$\langle i | \hat{O} | j \rangle = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r})$$

$$\langle ij | \hat{O} | kl \rangle = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') \hat{O}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_k(\mathbf{r}) u_l(\mathbf{r}')$$

gegeben; dabei sind die $u_i(\mathbf{r})$ die Einteilchen – Wellenfunktionen im quantenmechanischen Zustand ‘ i ’.

Es hat sich als sinnvoll erwiesen, Operatoren zu definieren, die Linearkombinationen aller Teilchenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren darstellen, wobei die Einteilchenzustände $u_i(\mathbf{r})$ die Entwicklungskoeffizienten sind.

Also:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \sum_i u_i(\mathbf{r}) \hat{b}_i$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \equiv \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) \hat{b}_i^\dagger. \quad (6.41)$$

Diese Operatoren beschreiben ein *Teilchenfeld*, dessen Quanten Bosonen (Fermionen) sind, ähnlich wie Photonen die Quanten des elektromagnetischen Feldes sind. Wir bezeichnen die Operatoren $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ und $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ als *Feldoperatoren*.

Die physikalische Bedeutung eines solchen Operators ist leicht demonstrierbar, wenn man die Wirkung von $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ auf den Vakuumzustand untersucht:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) |0_1, 0_2, \dots, 0_\infty\rangle &= \\ &= \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) \hat{b}_i^\dagger |0_1, \dots, 0_i, \dots, 0_\infty\rangle \\ &= \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) |0_1, \dots, 1_i, \dots, 0_\infty\rangle. \end{aligned}$$

Dabei ist $|0_1, \dots, 1_i, \dots, 0_\infty\rangle$ ganz offensichtlich ein Zustand, der nur 1 Teilchen im quantenmechanischen Zustand ‘ i ’ enthält. Er wird damit durch die Einpartikelwellenfunktion $u_i(\mathbf{r}')$ beschrieben und daraus folgt:

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) |0_1, 0_2, \dots, 0_\infty\rangle = \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.42)$$

Dies ist somit ein Teilchenzustand, der im Punkt $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit Null hat und daher im Punkte $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ lokalisiert ist. Daraus folgt:

- Der Feldoperator $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ erzeugt ein Teilchen im Orte \mathbf{r} .
- Der Feldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ vernichtet ein Teilchen im Orte \mathbf{r} .

Damit folgt die Darstellung des Hamiltonoperators nach diesen Feldoperatoren:

$${}_{II}\hat{H} = \sum_{i,j} \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3r d^3r' u_i^*(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') \hat{O}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_k(\mathbf{r}) u_l(\mathbf{r}') \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_k + \dots$$

und aus der Definitionsgleichung für $\hat{\psi}$ bzw. $\hat{\psi}^\dagger$ folgt unmittelbar:

$${}_{II}\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{O}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \dots \quad (6.43)$$

Damit erhalten wir für den Übergang von Einteilchenoperatoren aus der Darstellung der ersten Quantisierung in die der zweiten Quantisierung ganz allgemein:

•

$${}_I\hat{O} = \sum_{i=1}^N \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}_i) \quad (6.44)$$

Summe von Einteilchenoperatoren

1. Quantisierung

•

$${}_{II}\hat{O} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (6.45)$$

‘Summe’ von Einteilchenoperatoren

2. Quantisierung

Beispiele:

- Operator der kinetischen Energie:

$${}_I\hat{T} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_i^2$$

$${}_{II}\hat{T} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r})$$

und man bezeichnet gerne $(-\hbar^2/2m)\nabla^2$ als die *Operatordichte* der kinetischen Energie.

- Operator der Teilchendichte:

$$\begin{aligned}
{}_I \hat{n}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i) \\
{}_{II} \hat{n}(\mathbf{x}) &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \\
&= \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})
\end{aligned}$$

- Operator der Teilchenzahl:

$$\begin{aligned}
{}_I \hat{N} &= \sum_{i=1}^N 1 \\
{}_{II} \hat{N} &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot 1 \cdot \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\
&= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

Wir erhalten schließlich die Vertauschungsrelationen der Bose – Feldoperatoren aus der Definitionsgleichung und den Vertauschungsrelationen der Boseoperatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger :

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] &= \sum_{i,j} u_i(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}') [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0 \\
[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \sum_{i,j} u_i^*(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0 \\
[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \sum_{i,j} u_i(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] \\
&= \sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.46)
\end{aligned}$$

6.3 Das Schrödinger– und das Heisenbergbild

Wir beginnen mit der Ausgangsgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

oder

$$|\psi(t)\rangle = C \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\}.$$

Der Zustand $|\psi(0)\rangle$ des Systems zur Zeit $t = 0$ sei bekannt, also

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} |\psi(0)\rangle \quad (6.47)$$

oder

$$|\psi(0)\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}|\psi(t)\rangle \quad (6.48)$$

$|\psi(t)\rangle$ ist somit ein zeitabhängiger Zustandsvektor und man nennt diese Darstellung das *Schrödingerbild*:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_S(t)\rangle.$$

Den zeitunabhängigen Zustandsvektor $|\psi(0)\rangle$ bezeichnet man nun als den Zustandsvektor in der Heisenberg – Darstellung, dem *Heisenbergbild*.

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_H\rangle.$$

Ganz offensichtlich gilt die Transformationsregel:

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}|\psi_S(t)\rangle \\ \langle\psi_H| &= \langle\psi_S(t)|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}. \end{aligned} \quad (6.49)$$

Wir können aber auch Operatoren in beiden Darstellungen definieren. Wir gehen vom Matrixelement eines Einteilchenoperators aus:

$$\langle\psi'_S(t)|\hat{O}_S|\psi_S(t)\rangle = \underbrace{\langle\psi'_H|\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{O}_S\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}}_{\hat{O}_H(t)}|\psi_H\rangle.$$

Demnach gilt die Transformationsregel:

$$\hat{O}_H(t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{O}_S\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}. \quad (6.50)$$

Beim Übergang vom S–Bild in das H–Bild geht die Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors auf die Operatoren über:

<u>S–Bild</u>	<u>H–Bild</u>
Zustandsvektor zeitabhängig	Zustandsvektor zeitunabhängig
Operatoren zeitunabhängig	Operatoren i.a. zeitabhängig

Für die nun zeitabhängigen Operatoren finden wir die Bewegungsgleichung (*Heisenbergsche Bewegungsgleichung*):

$$\begin{aligned} \hat{O}_H(t) &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{O}_S\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} \\ \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{O}_S\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} - \\ &\quad \frac{i}{\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{O}_S\hat{H}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} \\ &= \frac{i}{\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}[\hat{O}_S, \hat{H}]\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} \\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{O}_H(t), \hat{H}]. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Daraus folgt die wichtige Regel: ist \hat{O}_S mit dem Hamiltonoperator vertauschbar, also

$$\left[\hat{O}_S, \hat{H} \right] = 0,$$

so ist der entsprechende Operator im H-Bild *keine* Funktion der Zeit:

$$\begin{aligned} \left[\hat{O}_S, \hat{H} \right] = 0 &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_H(t) = 0 \\ \hat{O}_S &= \hat{O}_H \neq f(t). \end{aligned} \quad (6.52)$$

Dies gilt insbesondere für den Hamiltonoperator selbst!!

Wie wirkt sich nun die Transformation von einem Bild in das andere auf die Vertauschungsrelationen aus?

$$\begin{aligned} \left[\hat{b}_{Hi}^\dagger(t), \hat{b}_{Hj}(t') \right] &= \\ &= \left[\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \hat{b}_{Si}^\dagger \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\}, \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} t' \right\} \hat{b}_{Sj} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \right] \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \hat{b}_{Si}^\dagger \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t') \right\} \hat{b}_{Sj} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} - \\ &\quad \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} t' \right\} \hat{b}_{Sj} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} (-t' + t) \right\} \hat{b}_{Si}^\dagger \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \end{aligned}$$

mit dem Ergebnis, daß wir ein identes Ergebnis *nur* dann erhalten, wenn die Operatoren *gleichzeitig* wirken:

$$\left[\hat{b}_{Hi}^\dagger(t), \hat{b}_{Hj}(t) \right] = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \underbrace{\left[\hat{b}_{Si}^\dagger, \hat{b}_{Sj} \right]}_{\delta_{i,j}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} = \delta_{i,j}. \quad (6.53)$$

Die Behandlung der Vertauschungsrelationen von *nicht* gleichzeitig wirkenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bildet die Grundlage zur störungstheoretischen Behandlung festkörperphysikalischer Vielteilchenprobleme unter Verwendung von Greenschen Funktionen.